



FBB3130 Kvantdynamik 7,5 hp

Quantum Dynamics

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

Fastställande

Kursplan för FBB3130 gäller från och med HT10

Betygsskala

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Grundläggande kunskaper i Fortran krävs eftersom subrutiner som beräknar fysikaliska förlopp är skrivna i Fortran. Kunskaper i C/C++ går bra.

Bakgrund i kvantmekanik och elektromagnetisk fältteori.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

”Kvantdynamik” (KD) ger ett omfattande teoretiskt redskap för detta tvärvetenskapliga område, med en lång rad problem som omfattar: underliggande vetenskap, ultra-snabb dynamik och materialstruktur, dynamiska aspekter av olika spektroskopier inklusive absorption, emission, spridning och pulsutbredning genom resonanta media så väl som olika tekniska tillämpningar.

”Kvantdynamik” introducerar viktiga koncept och kunskaper till studenten som är lägliga i tiden. Den här kursen är avsedd för studenter som vill lära sig om kvantdynamik för molekylers rörelse i yttre fält, så väl som tillämpningar i olika spektroskopier och icke-linjär optik.

Efter att ha avslutat kursen framgångsrikt kommer studenten att kunna:

- 1) Förstå molekylodynamikens grundläggande principer på kvantnivå.
- 2) Räkna och visualisera dynamiken hos ett vågpaket och laser fält. Att få erfarenhet i kvantdynamiska simuleringar och att förstå tidens roll i olika fysikaliska och kemiska processer i yttre fält.

Förstå molekylers dynamik i ett elektromagnetiskt fält och utbredning av laserpulser genom resonanta media och att få erfarenhet i kvantdynamiska simuleringar

Kursinnehåll

Kvantdynamik är grunden för molekylär och optisk fysik, vilket har inverkan på olika fält, från molekylodynamik och ljusutbredning till olika tillämpningar som kvantdatorer, molekylär elektronik, och materialvetenskap. ...

Femtosekundröntgenpulser finns redan tillgängliga i FLASH (Hamburg) och Stanford Linear Accelerator Center. Denne nya källa av ultrakorta röntgenpulser öppnar unika möjligheter att kartlägga molekylodynamik men upplösning av 1 Ångström som är av avgörande betydelse i materialvetenskap och biologi. ”Kvantdynamik” ger studenterna viktiga koncept om dynamiken i olika fysiska och kemiska processer. Denna kurs är avsedd för den som vill lära sig det senaste inom ultrasnabba fenomen i kemi och fysik.

Den här kursen har utvecklats parallellt med en snabbt framåtskridande tvärvetenskaplig forskning och teknologiska utvecklingar relaterade till ultrasnabb molekylodynamik och angriper tre huvudämnen

Del 1: grundläggande kvantmekanik för ljus-materia växelverkan / kvantmolekylodynamik och dynamik för ljusutbredning.

Del 2: Tidsberoende spektroskopier

Del 3: Dynamik för utbredning av ultrakorta laserpulser.

Föreläsningar

- 1) Tidsberoende Schrödingerekvationen. Born-Oppenheimerapproximationen. Elektroniska och nukleära frihetsgrader.
- 2) Tidsberoende Schrödingerekvationen. Harmoniska oscillatorn. Dissociation.
- 3) Allmänna egenskaper hos vågpaket: Kvant- kontra klassisk dynamik. Revivalfenomen.
- 4) Dynamik för växelverkan mellan fotoner och molekyler. Fermis Gyllene regel. Franck-Condonprincipen.

- 5) Mekanismen för relaxation av exciterade tillståndet. Dynamik för fotoabsorption och fluorescens. Mekanism för linjebreddning.
- 6) Dynamik för Ramanspridning och Kramers-Heisenbergs ekvation. Tidsförlopp för ljusspridning.
- 7) Numeriska beräkningar
- 8) Dynamik hos molekyler i starka laserfält. Täthetsmatrisformalism och Maxwells ekvationer.
- 9) Strålningskador. Multifotonjonisation och molekylidissociation.
- 10) Dynamik för pulsutbredning. Ytteomet.
- 11) Självsådd stimulerad Ramanspridning. Fyrvågsmixning. Hastighetsreducering och kompression av pulsen. Numeriska beräkningar
- 12) Tidsupplöst strukturbestämning

Kursupplägg

Sex föreläsningstillfällen (varje gång 2x45 minuters föreläsning) med hemuppgifter (före föreläsningarna kommer läsning, ca 1 dags arbetsbörda, och arbetsbördan för varje hemuppgift är ca 2 dagar);

Två datorlabbar (arbetsbörda ca 2 dagar för varje labb) kommer att ges, baserade på praktiska problem i nanofotonik. Total arbetsbörda är ca 23 dagar.

Kurslitteratur

Detaljerade föreläsninganteckningar kommer att distribueras.

Kursböcker

1. R. Schinke, Photodissociation Dynamics, Cambridge University Press, Cambridge, 1995
2. S. Svanberg, Atomic and Molecular Spectroscopy, Springer-Verlag, Heidelberg, 2001.

Examination

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

Övriga krav för slutbetyg

För den grundläggande 7,5p-delen,

Hemuppgifter (inkl datoruppgifter) på ca 30 timmar krävs oc resultatena kommer påverka slutliga betyget.

Studenterna skall göra en skriven examination direkt relaterat till kursinnehållet (mest grundläggande kunskaperna om begrepp i nanofotonik och fotonikrelaterade beräkningssproblem).

Två datorlabbar kommer ges i forskningslabbet i avdelningen, baserade på praktiska problem i nanofotonik. De kommer påverka slutbetyget.

De två labbprojekten kommer att placeras ungefär efter att 1/4 och 3/4 av kursen pågått, för att utvärdera praktisk kunskap.

Examination:

5 hemuppgifter, 1,5 poäng, betygskala G, U

LAB1 - Laborationsuppgift, 1,0 poäng, betygskala G, U

LAB2 - Laborationsuppgift, 1,0 poäng, betygskala G,U

Skriven tentamen, 4,0 poäng, betygskala A, B, C, D, E, FX, F

Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.
- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.